第八章　数值积分与数值微分

8.1 求 积 公 式

8.1.1 求积公式

对定义在区间［***a,b***］上的定积分

$$I[f]=\int_a^b f(x)dx = F(b)-F(a)$$

以上公式多称为牛顿-莱布尼兹公式，$\boldsymbol{F(x)}$为$\boldsymbol{f(x)}$的原函数. 但有时原函数不能用初等函数表示，有时原函数又十分复杂，难于求出或计算. 如被积函数为:

$$\mathrm{e}^{-x^2},\ \frac{\sin\ x}{x}$$

等函数的积分都无法解决，当被积函数为一组数据时，更是无能为力. 为解决定积分的近似计算, 从定积分的定义:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{n\to\infty}\sum_{k=1}^{n} f(\xi_k)\Delta x_k \qquad 有$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \tag{8.1}$$

这样就避开了求原函数的运算.(8.1)式就叫做求积公式，$A_k(k=0,1,\ldots,n)$与函数$f(x)$无关，叫做求积系数,显然要确定一个求积公式，要确定求积结点x_k和求积系数A_k，或者说不同的求积结点和求积系数将确定不同的求积公式.

8.1.2 求积公式的余项和代数精度

一般情况下，(8.1)两端并不相等.我们称:

$$R[f] = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \tag{8.2}$$

(8.2)为求积公式(8.1) 的余项，或截断误差.

为考查一个求积公式的误差，通常用代数精度来表示，如果一个求积公式对于不超过m次的多项式都能够精确成立($R[f]\equiv 0$)，而对$m+1$次以上的多项式不能精确成立，则称该求积公式的代数精度为m.

例如求积公式：$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \frac{1}{3}f(-1)+\frac{4}{3}f(0)+\frac{1}{3}f(1)+R[f]$

验证当$f(x)=x^m$，$m=0,1,2,3,4$时，是否有$R[x^m]=0$

$$f(x)\equiv 1,\text{左边} = 2 = \text{右边} = \tfrac{1}{3}\times 1+\tfrac{4}{3}\times 1+\tfrac{1}{3}\times 1$$

$$f(x)=x,\text{左边}=\frac{1^2-(-1)^2}{2}=0=\text{右边}=\tfrac{1}{3}\times(-1)+\tfrac{4}{3}\times 0+\tfrac{1}{3}\times 1$$

$$f(x)=x^2,\text{左边}=\frac{1^3-(-1)^3}{3}=\tfrac{2}{3}=\text{右边}=\tfrac{1}{3}\times(-1)^2+\tfrac{4}{3}\times 0^2+\tfrac{1}{3}\times 1^2$$

$$f(x)=x^3,\text{左边}=\frac{1^4-(-1)^4}{4}=0=\text{右边}=\tfrac{1}{3}\times(-1)^3+\tfrac{4}{3}\times 0^3+\tfrac{1}{3}\times 1^3$$

$$f(x)=x^4,\text{左边}=\frac{1^5-(-1)^5}{5}=\tfrac{2}{5}\neq\text{右边}=\tfrac{1}{3}\times(-1)^4+\tfrac{4}{3}\times 0^4+\tfrac{1}{3}\times 1^4=\tfrac{2}{3}$$

所以以上求积公式的代数精度为3.

任何一个求积公式的代数精度至少为零　即取$f(x)=1$时公式应精确成立，这是求积系数应满足的起码条件，可以用它检验一个求积公式的系数的正确性.

8.1.3 矩形求积公式

把$f(x)$在a处作Taylor展开:

$f(x)=f(a)+f'(\xi)(x-a)$，　ξ在x, a之间, 两端积分:

$$\int_a^b f(x)dx=\int_a^b f(a)dx+\int_a^b f'(\xi)(x-a)dx$$

$$=f(a)(b-a)+\int_a^b f'(\xi)(x-a)dx$$

注意到右端第二项积分，设$f'(x)$在[a,b]上连续，而$x-a$在[a,b]上不变号(非负)，据积分中值定理有:

$$\int_a^b f'(\xi)(x-a)dx = f'(\eta)\int_a^b (x-a)dx = \frac{(b-a)^2}{2}f'(\eta)$$

于是有左矩形公式(如图)

$$\int_a^b f(x)dx = f(a)(b-a) + \frac{(b-a)^2}{2}f'(\eta) \qquad (8.3)$$

同理,*f*(*x*)在*b*点展开,可得右矩形公式(如图)：

$$\int_a^b f(x)dx = f(b)(b-a) - \frac{(b-a)^2}{2}f'(\eta) \qquad (8.4)$$

f(*x*)在中点(*a*+*b*)/2展开,可得中矩形公式(如图)：

$$\int_a^b f(x)dx = f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) + \frac{(b-a)^3}{24}f''(\eta) \qquad (8.5)$$

不难验证，(8.3)和(8.4)具有零次代数精度，(8.5)具有一次代数精度.

8.1.4 内插求积公式

由插值可知，对任一函数$f(x)$(包括表格形式的函数)可用一n次多项式对其插值，即

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x)$$

因此 $$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b P_n(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx$$

当$P_n(x)$为拉格朗日插值多项式时，即

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)$$

则 $$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k)dx + \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)dx$$

$$= \sum_{k=0}^{n}\left(\int_a^b l_k(x)dx\right)f(x_k) + R_n[f] = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + R_n[f] \qquad (8.6)$$

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) + R_n[f] \qquad (8.6)$$

其中:

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx = \int_a^b \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}dx \qquad (8.7)$$

$$R_n[f] = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)dx \qquad (8.8)$$

通常将公式(8. 6)叫做内插求积公式.

§8.2　牛顿-柯特斯公式

为便于上机计算，通常在内插求积公式中取等距节点，即将积分区间$[a,b]$ n等分，即令$h=(b-a)/n$，且记$x_0=a, x_n=b$，则节点为$x_k=x_0+kh(k=0,1,\ldots n)$，作变换:$t=(x-x_0)/h$，代入求积系数公式:

$$A_k=\int_a^b l_k(x)dx=\int_a^b \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}dx$$

$$=\int_0^n \frac{h^n t(t-1)\cdots(t-\overline{k-1})(t-\overline{k+1})\cdots(t-n)}{(-1)^{n-k}h^n(n-k)!k!}hdt$$

$$=\frac{(-1)^{n-k}h}{(n-k)!k!}\int_0^n t(t-1)\cdots(t-\overline{k-1})(t-\overline{k+1})\cdots(t-n)dt \qquad (8.9)$$

这种由等距节点的内插求积公式通常叫做牛顿-柯特斯公式,下面介绍几个常用的公式:

8.2.1 梯形公式

取$a=x_0, b=x_1$,(即$n=1$)，代入(8.9)式得

$$A_0=\frac{(-1)^1 h}{1!}\int_0^1 (t-1)\mathrm{d}t=-\frac{1}{2}(t-1)^2\Big|_0^1 h=\frac{b-a}{2}.$$

$$A_1=\frac{(-1)^0 h}{0!}\int_0^1 t\,\mathrm{d}t=\frac{1}{2}t^2\Big|_0^1 h=\frac{b-a}{2}.$$

所以梯形公式为

$$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{b-a}{2}\left[f(a)+f(b)\right] \qquad (8.10)$$

从图8.1看到，这是用梯形面积近似代替曲边梯形的面积，对梯形公式的误差估计有如下定理：

定理8.1 设$f(x)$为二阶连续可微函数，则梯形求积公式的余项为 （证明）

$$R_1=\int_a^b f(x)dx-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)\qquad \xi\in(a,b)$$

即 $$R_1=-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi)\qquad \xi\in(a,b)\qquad (8.11)$$

其中$h=b-a$，记成上面形式是为以后复化求积公式余项的一致性. 由余项公式立刻可以看出梯形公式的代数精度为1.

例1 利用梯形公式计算 $I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$

解:

$$I\approx\frac{1-0}{2}\left[\frac{4}{1+0^2}+\frac{4}{1+1^2}\right]=\frac{1}{2}(4+2)=3.$$

8.2.2 抛物形（辛卜生）公式

取$a=x_0,(a+b)/2=x_1,b=x_2$,（即$n=2$），代入(8.9)式得

$$A_0=\frac{(-1)^2h}{2!}\int_0^2(t-1)(t-2)\,dt=\frac{h}{2}\times\frac{2}{3}=\frac{h}{3}.$$

$$A_1=\frac{(-1)\ \ h}{1!}\int_0^2 t(t-2)\,dt=-h\times\left(-\frac{4}{3}\right)=\frac{4h}{3}.$$

$$A_2=\frac{h}{2!}\int_0^2 t(t-1)\,dt=\frac{h}{2}\times\frac{2}{3}=\frac{h}{3}.$$

所以抛物形公式为

$$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{h}{3}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right]\qquad(8.12)$$

其中$h=(b-a)/2$, 上式也可写成:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right] \qquad (8.13)$$

抛物形公式通常也称为辛普生公式，从图8.2看到，抛物形公式是用抛物线围成的曲边梯形近似代替$f(x)$围成的曲边梯形.

定理8.2 设$f(x)\in C^4[a,b]$，则辛普生公式的误差估计为:

$$R_2[f]=-\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi) \qquad \xi\in(a,b)$$

直接可以验证抛物形公式代数精度为3(对$f(x)$为三次以下多项式精确成立).

例2 利用抛物形公式计算 $I=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$

解:

$$I\approx\frac{h}{3}[f(0)+4f(0.5)+f(1)]=\frac{1}{6}(4+\tfrac{64}{5}+2)=3.1333$$

8.2.3 牛顿-柯特斯公式

(8.9)式给出

$$A_k=\frac{(-1)^{n-k}h}{(n-k)!k!}\int_0^n\frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-k}dt$$

$$=\frac{(b-a)(-1)^{n-k}}{n(n-k)!k!}\int_0^n\frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-k}dt=(b-a)C_k^{(n)} \qquad (8.14)$$

其中:

$$C_k^{(n)}=\frac{1}{b-a}A_k=\frac{(-1)^{n-k}}{n(n-k)!k!}\int_0^n\frac{t(t-1)\cdots(t-n)}{t-k}dt \qquad (8.15)$$

可以看出，$C^{(n)}{}_k$不依赖函数$f(x)$和积分区间$[a,b]$，可以事先计算出来，通常叫做牛顿-柯特斯系数，下面给出n从1～6的牛顿--柯特斯系数表8-1：

结束

表8-1

n	$C_k^{(n)}$						
1	1/2	1/2					
2	1/6	4/6	1/6				
3	1/8	3/8	3/8	1/8			
4	7/90	32/90	12/90	32/90	7/90		
5	19/288	75/288	50/288	50/288	75/288	19/288	
6	41/840	216/840	27/840	272/840	27/840	216/840	41/840

对牛顿-柯特斯公式，当$f(x)\in C^n[a,b]$，$f^{(n+1)}(x)$在$[a,b]$上存在时，求积公式的余项为:

$$R_n[f]=\int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)dx \qquad \xi\in[a,b]$$

对$f(x)$为任何不超过n次的多项式，均有$f^{(n+1)}(x)\equiv 0$，因而$R_n[f]\equiv 0$，也就是说，牛顿-柯特斯公式的代数精度至少为n.

我们可以证明当n为偶数时，牛顿-柯特斯公式的代数精度可达到$n+1$.

证明: 令$n=2k$,设 $q_{n+1}(x)=\sum_{k=0}^{n+1} a_k x^k$

为任一$n+1$次多项式，其最高次系数为a_{n+1}，则它的$n+1$阶导数为

$$q_{n+1}^{(n+1)}(x)=a_{n+1}(n+1)!$$

$$R[q_{n+1}(x)]=\int_a^b \frac{q_{n+1}^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega(x)dx=a_{n+1}\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)dx$$

$$=a_{n+1}\int_0^{2k} h^{n+2}t(t-1)(t-2)\cdots(t-n)dt$$

下面我们证明 $\int_0^{2k} t(t-1)(t-2)\cdots(t-n)dt=0$

作变换***u*=*t*-*k***，则

$$\int_0^{2k} t(t-1)\cdots(t-\overline{k-1})(t-k)(t-\overline{k+1})\cdots(t-\overline{2k-1})(t-2k)dt$$

$$=\int_{-k}^{k}(u+k)(u+k-1)\cdots(u+1)u(u-1)\cdots(u-k+1)(u-k)du$$

记 $\psi(u)=(u+k)(u+k-1)\cdots(u+1)u(u-1)\cdots(u-k+1)(u-k)$

容易验证$\psi(u)$为奇函数，即$\psi(-u)= -\psi(u)$,而奇函数在对称区间上的积分为零，所以

$$R_n[q_{n+1}(x)] = 0$$

也就是说，当n为偶数时，牛顿-柯特斯公式对不超过$n+1$次的多项式均能精确成立，因此，其代数精度可达到$n+1$.正是基于这种考虑，当$n=2k$与$n=2k+1$时具有相同的代数精度，因而在实用中常采用n为偶数的牛顿-柯特斯公式，如抛物形公式($n=2$)等.

§8.3 复化求积公式

从求积公式的余项的讨论中我们看到，被积函数所用的插值多项式次数越高，对函数光滑性的要求也越高. 另一方面，插值节点的增多(n的增大)，在使用牛顿-柯特斯公式时将导致求积系数出现负数(当$n\geq 8$时, 牛顿-柯特斯求积系数会出现负数) 因而在实际应用中往往采用将积分区间划分成若干个小区间，在各小区间上采用低次的求积公式(梯形公式或抛物形公式)，然后再利用积分的可加性，把各区间上的积分加起来，便得到新的求积公式，这就是复化求积公式的基本思想. 为叙述方便，我们仅讨论各小区间均采用同一低次的求积公式的复化求积公式 对各小区间也可分别采用不同的求积公式，也可推出新的求积公式，读者可按实际问题的具体情况讨论

8.3.1. 复化梯形公式

用**n+1**个分点将区间[**a**，**b**]**n**等分。每个区间长

$$h=\frac{b-a}{n},n+1\text{个分点}\ x_k=a+kh\ ,k=0,1,2,\cdots,n$$

则
$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}}f(x)dx$$

在$[x_k, x_{k+1}]$上用梯形公式，则

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{x_{k+1}-x_k}{2}\left[f(x_{k+1})+f(x_k)\right]+\sum_{k=0}^{n-1}R_k[f]$$

$$=\frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)\right]+\sum_{k=0}^{n-1}R_k[f]\qquad(8.18)$$

记
$$T_n=\frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{n-1}f(x_k)\right]\qquad(8.19)$$

T_n叫做复化梯形求积公式，下标n表示将积分区间等分的份数.

从公式的特点可以看出，内节点$x_k(k=1,2,\ldots n-1)$作为小区间的端点参与前、后两个小区间的计算，因而系数为2，端点a与b只参与一次计算，系数为1.

如果在T_n的基础上，将各小区间对分，这时节点数为$2n+1$，分段数为$2n$.记新的分点的函数值的和为σ_n，则T_{2n} 应为原内节点与新增节点函数值的和的两倍，加上两端点a,b的函数值之和再乘上新区间长度的一半，即

$$T_{2n}=\frac{h'}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_{2i})+2\sum_{i=1}^{n}f(x_{2i-1})\right]$$

$$=\frac{1}{2}\times\frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_{2i})+2\sum_{i=1}^{n}f(x_{2i-1})\right]$$

$$=\frac{1}{2}(T_n+h\sigma_n) \qquad (8.20)$$

或写为 $$T_{2n}=\frac{1}{2}T_n+h'\sigma_n \qquad (8.21)$$

这里 $h'=h/2$,为对分新区间的长度.

从这一公式可以看出，将区间对分后，原复化梯形公式的值T_n作为一个整体保留.只需计算出新分点的函数值，便可得出对分后的积分值，不需重复计算原节点的函数值，从而减少了计算量.

定理8.3 设$f(x)\in C^2[a,b]$，复化梯形公式的截断误差

$$R[T_n]=-\frac{b-a}{12}h^2f''(\xi)\qquad \xi\in[a,b]$$

(证明)

这一复化梯形求积公式的余项在形式上与(8.13)式相同，不同的是，这里的$h=(b-a)/n$，而(8.13)式中的$h=b-a$.

利用复化求积公式的余项，我们可以估计出在满足精度的要求下，应将积分区间等分多少份，即n取多少.这种误差估计方法称为事前误差估计.如例8.3

例3 利用复化梯形公式计算 $I=\int_0^1 \frac{\sin x}{x}dx$

使其误差限为10^{-4}，应将区间［0, 1］几等分?

解：因为被积函数 $f(x)=\frac{\sin x}{x}=\int_0^1 \cos txdt$

$$\therefore\ f^{(k)}(x)=\int_0^1 \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}(\cos tx)dt=\int_0^1 t^k\cos\left(tx+\frac{k\pi}{2}\right)dt$$

$$\therefore\ \left|f^{(k)}(x)\right|\le\int_0^1\left|t^k\cos\left(tx+\frac{k\pi}{2}\right)\right|dt\le\int_0^1 t^k dt=\frac{1}{k+1}.$$

$$\therefore\ \left|R[T_n]\right|=\left|-\frac{1-0}{12}h^2 f''(\xi)\right|\le\frac{1}{12}h^2\times\frac{1}{2+1}=\frac{1}{36}h^2\le 10^{-4}.$$

$$\therefore\quad h\le 6\times 10^{-2},\qquad \therefore\quad n=\frac{1}{h}\ge\frac{1}{6}\times 10^2.$$

取n=17可满足要求.

另一方法是利用公式前后两次计算结果的差来估计误差的，即用 $|T_{2n}-T_n|<\varepsilon$,这是因为

$$\int_a^b f(x)dx - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi)$$

$$\int_a^b f(x)dx - T_{2n} = -\frac{b-a}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(\eta)$$

$$\therefore T_{2n} - T_n = -\frac{b-a}{12}h^2\left[f''(\xi) - \frac{1}{4}f''(\eta)\right]$$

当 $f''(x)$ 在 $[a,b]$ 上连续，并且假定当 n 充分大时有 $f''(\xi)\approx f''(\eta)$，则

$$\therefore T_{2n} - T_n \approx -\frac{b-a}{12}\left(\frac{h}{2}\right)^2 \times 3f''(\eta)$$

$$= 3\left[\int_a^b f(x)dx - T_{2n}\right] = 3R[T_{2n}].$$

即 $$R[T_{2n}] \approx \frac{1}{3}[T_{2n} - T_n]$$

因此当｜T_{2n}-T_n｜<ε时，可认为

$$|R[T_{2n}]| < \frac{1}{3}\varepsilon < \varepsilon$$

这种误差估计方法通常叫做事后误差估计，在计算机上用来控制计算精度常用这一方法，有的也把这种方法叫做步长的自动选取或逐次对分的方法.

8.3.2 复化抛物形公式

将积分区间$[a,b]$ $2m$等分，$n=2m$，节点为$x_k=a+kh\,(k=0,1,2,\ldots,2m)$，$h=(b-a)/2m$. 在每两个小区间$[x_{2k},x_{2k+2}]$ $(k=0,1,2,\ldots,m-1)$上用抛物形公式，则有：

$$\int_a^b f(x)dx=\sum_{k=0}^{m-1}\int_{x_{2k}}^{x_{2k+2}}f(x)dx$$

$$=\sum_{k=0}^{m-1}\frac{h}{3}\left[f(x_{2k})+4f(x_{2k+1})+f(x_{2k+2})\right]+\sum_{k=0}^{m-1}R_k[f]$$

$$=\frac{h}{3}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{m-1}f(x_{2k})+4\sum_{k=0}^{m-1}f(x_{2k+1})\right]+\sum_{k=0}^{m-1}R_k[f]$$

$$S_{2m}=\frac{h}{3}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{m-1}f(x_{2k})+4\sum_{k=0}^{m-1}f(x_{2k+1})\right]\qquad(8.25)$$

S_{2m}叫做复化抛物形求积公式，下标$2m$表示积分区间等分的份数，$2m$强调为偶数份.